数理解析研究所講究録
933巻 1995年 113-123

非線形格子における局在モード
ー非線形性と空間不連続性および空間の次元についてー

群馬大工　武野正三　(Shozo Takeno)

§1. はじめに

ソリトンの理論は,周知のように,流体力学,格子力学,プラズマ物理学等物理学の問題に端を発しているが,近年それはその数学的側面において著しい発展を遂げ,[1] 佐藤理論等はその頂点の一つを形成している。[2] ソリトンを非線形微分方程式あるいは差分方程式として記述し,その解を求めようとするとき,いくつかの特徴的なことが通常行われている。それらをいくつか列挙すると①問題は大抵1次元に対して,あるいは還元して考察されている。②場の変化はゆっくりしたものに話が限られている。③②とも関連するが,多くの場合空間連続系が取扱われている。④非線形の問題を線形の問題に転換して理論の展開が行われている(逆散乱法)等々である。これらの手法は,通常非線形可積分系に対する方法となっている。

ソリトンの問題は,数理物理学および数学の発展に大きな寄

与をなしたが、それと並行して重要なことは、その基礎的概念が、物理学においては、素粒子論、場の理論、相対性理論より、流体、固体物理、プラズマ、非線形光学、生物物理に至る分野に横断的に適用され、また色々な工学上の問題にも現われているという学際的な面を持っていることである。これら物理学、工学の問題においては、系固有のモード（ここでは非線形モード）が存在し得ることが興味あり、重要なことであって、系それ自身が数学的な意味での可積分性を持つかどうかということは余り問題とはされないことが多い。勿論、可積分性が存在すれば（或はすることが証明できれば）それに越したことはないが、そのことに拘泥しては、これらの分野においては問題の理解の発展につながり難い場合が多い。

本論では上記のことと関連して、最近筆者が行っている主要な研究の一つとして、空間不連続、或いは格子系における非線形局在モードについて述べることにする。[3,4] 取扱う系は一般に非可積分系であり、この非線形空間不連続系に固有なモードとして、局在モードという非線形モードが普遍的に存在し得ることを述べ、1次元系の場合、それが通常のソリトン的性質を持っていることを示すことにする。系の非可積分性と筆者の数学的力不足により、内容はいくつかの近似解析計算、数値計算の援用を含んでいることを始めにお断りしておく。ここでは、

数学的な厳密性よりは概念的普遍性を問題としている。

§2. 任意次元離散型非線形シュレディンガー方程式の局在モード解とその連続体近似版

d次元立方格子における格子点 $\vec{n}=(n_1, n_2, \cdots, n_d)$ (n_i:整数) におけるスカラー場 $u\equiv u(\vec{n},t)\equiv u(\vec{n})$ の次の離散形非線形シュレディンガー方程式

$$i\frac{du(\vec{n})}{dt}=\epsilon u(\vec{n})-J\sum_{i=1}^{d}[u(\vec{n}+\vec{e}_j)+u(\vec{n}-\vec{e}_j)]-J'|u(\vec{n})|^2u(\vec{n}) \tag{1}$$

を考える。$\epsilon>0$, $J>0$, $J'>0$ は定数である。(1)式の与える定常モード解は $u(\vec{n})=\phi(\vec{n})e^{-i\omega t}$ とおき、$\phi(\vec{n})$ は t によらないとして、(1)を次の形の非線形固有値問題に還元し、その解を求めることにより得られる。

$$\epsilon\phi(\vec{n})-J\sum_{i=1}^{d}[\phi(\vec{n}+\vec{e}_j)+\phi(\vec{n}-\vec{e}_j)]-J'\phi(\vec{n})^3=\omega\phi(\vec{n}) \tag{2}$$

一方、(1),(2)に対して連続体近似を適用すると

$$i\frac{\partial u}{\partial t}=(\epsilon-2J)u-Ja^2\Delta u-J'|u|^2u, \tag{3}$$

$$(\epsilon-2J)\phi-Ja^2\Delta\phi-J'\phi^3=\omega\phi \tag{4}$$

となる。a は格子定数である。$d=1$ のとき、(3),(4)は通常

の非線形シュレディンガー方程式となり，その包絡ソリトン解はソリトン理論に於て既知のことである。一方 $d \geqq 2$ の場合，(3)，(4)のソリトンは安定な形では存在しない(collapse)ことがプラズマ物理学，非線形光学等に於てよく知られているところである。[5~7] ところが，この式(2)に於ては，包絡ソリトンに対応する局在モードという安定な解が存在し得る。

固体物理学の観点からみると，(2)式は次式で表わされる線形格子

$$\epsilon\phi(\vec{n}) - J\sum_{i=1}^{d}\left[\phi(\vec{n}+\vec{e}_i) + \phi(\vec{n}-\vec{e}_i)\right] = \omega\phi(\vec{n}) \tag{5}$$

の線形のエネルギー帯

$$\omega_0(\vec{\delta}) = \epsilon - 2J\sum_{i=1}^{d}\cos(\delta_i a), \qquad \vec{\delta} = (\delta_1, \delta_2, \cdots, \delta_d) \tag{6}$$

の下端 $\omega_m = \epsilon - 2dJ$ より低いエネルギー領域 $(\omega < \omega_m)$，即ち禁止帯に，系固有の非線形性 $J'\phi(\vec{n})^3$ によって誘起される局在モードが発生し得るということが分る。このことは，線形格子の格子グリーン関数

$$g(\vec{n}) = \frac{1}{N}\sum_{\vec{\delta}}\frac{e^{i\vec{\delta}\cdot\vec{n}a}}{\omega_0(\vec{\delta}) - \omega} = \frac{1}{2J}\int_0^\infty \exp\left(-\frac{\epsilon-\omega}{2J}\tau\right)\prod_{i=1}^{d} I_{n_i}(\tau)\,d\tau \tag{7}$$

$(\epsilon - \omega)/2J > d$, I: Bessel関数

を導入して(4)を

$$\phi(\vec{n}) = J' \sum_{\vec{m}} g(\vec{n}-\vec{m})\, \phi(\vec{m})^3 \tag{8}$$

の形にreduceすることにより示すことができる。即ち，いま，この局在モードが，その中心を格子点 $\vec{n}=0$ に持つとし，その振幅をAとすると，$\phi(\vec{n}) = A\,\xi(\vec{n})$, $\xi(\vec{0})=1$ として

$$1 = J' A^2 \sum_{\vec{m}} g(\vec{m})\,\xi(\vec{m})^3, \qquad \xi(\vec{n}) = \frac{\sum_{\vec{m}} g(\vec{n}-\vec{m})\,\xi(\vec{m})^3}{\sum_{\vec{m}} g(\vec{m})\,\xi(\vec{m})^3} \tag{9}$$

が得られる。(9)の第二式の解を第一式の $\xi(\vec{n})$ に代入することにより，$\omega < \epsilon - 2dJ$ の領域に現われる局在モードの振動数固有値 ω が得られ，形状関数 $\xi(\vec{n})$ は原点 $\vec{n}=0$ のまわりで急激に（指数関数的に）減小することを示すことができる。[4]

尚，上の結果を(1)の一般形

$$i\frac{du(\vec{n})}{dt} = \epsilon\, u(\vec{n}) - J\sum_{i=1}^{d}\left[u(\vec{n}+\vec{e}_i) + u(\vec{n}-\vec{e}_i)\right] - F(|u(\vec{n})|^2)\,u(\vec{n}) \tag{10}$$

（$F(x)$ は x の任意関数）に拡張することは容易である。

この節で得られた結果は，① 空間2次元以上では，不連続系における非線形モードとそれから連続体近似によって得られる連続系の非線形モードには本質的な相違があること，② (10)の形の非線形格子方程式には，上に得られた定常局在モードは普遍的に存在し得るであろうこと，③ このような一般的結果が系の非可積分性にもかかわらず得られたのは，非線形項の

影響を考慮するに当り，我々は線形系のエネルギー帯 $\omega_0(\vec{\beta}) = \epsilon - 2J\sum_{i=1}^{d}\cos(\beta_i a)$ の外領域，即ち禁止帯のみに着目したからである。

このような局在モードはソリトン理論の場合と同様に，分散性と非線形性とのbalanceにより生ずるが，ここでは分散性を特徴づけるのは格子グリーン関数で，それは以下のような空間の次元数による相違を持っている：

(a) 解析性

$$g(\vec{n}) = \frac{e^{-|n|z}}{2J\sinh(z)}, \qquad z = \cosh^{-1}\left(\frac{\epsilon-\omega}{2J}\right) \quad \text{for } d=1 \tag{11}$$

$g(\vec{n})$ for $d \geq 2$: $d=2$ の特別な場合を除き解析的に表わされない。 (12)

(b) 発散性

$$\lim_{\omega\to\omega_m} g(\vec{n}) = \begin{cases} \infty & d=1 \\ \text{logarithmic divergence}, & d=2 \\ \text{finite} & d=3 \end{cases} \tag{13}$$

(11)は，$d=1$ のとき，局在モードが存在し得れば，その固有振動数は系の何如の非線形性に対しても

$$\omega = \omega_0(iK), \qquad K = K(A) \tag{14}$$

の如く，非線形の振動数帯のエネルギー $\omega_0(\vec{\delta})$ も $\omega_0(\vec{0}+i\vec{k})$ の形でその禁止帯領域に拡張したものになっていることを示し，これは普遍的結果である。(13)は，$d=1,2$ の場合，僅かな非線形によって局在モードが発生し得るが，$d\geq 3$ の場合，非線形性の強さにはしきい値(threshold)が存在することを示している。

§3. 量子系における非線形局在モード

(1)式と類似の式がもっと現実的な場合に対応するモデルに対して導かれる例として，量子系を取上げる。系のハミルトニアン H は

$$H=\epsilon\sum_{\vec{n}} S^z(\vec{n}) - (J/2)\sum_{\vec{n},\vec{m}} J(\vec{n},\vec{m})\left[S^+(\vec{n})S^-(\vec{m})+S^-(\vec{n})S^+(\vec{m})\right] \tag{15}$$

で与えられる場合を考察する。ここに，$S(\vec{n})\equiv(S^x(\vec{n}),S^y(\vec{n}),S^z(\vec{n}))$ は格子点 $\vec{n}$ に associate したスピン演算子で，$S^{\pm}(\vec{n})=S^x(\vec{n})\pm iS^y(\vec{n})$ が成り立つ。ϵ，$J(\vec{n},\vec{m})$ は定数である。スピン演算子 $S(\vec{n})$ の大きさは S であり，$S=1/2$ の場合，(15)式は励起エネルギー ϵ，交換相互作用 $J(\vec{n},\vec{m})$ の励起子のハミルトニアンを表わす。一個のスピン $S(\vec{n})$ の固有状態は $|S,M\rangle$ $(M=-S,-S+1,\cdots,S-1,S)$ で記述される。但し M は $S^z(\vec{n})$ の固有値である。このスピン系の真空状態 $|0\rangle$ は

$$|0\rangle_{\vec{n}} = |S, -S\rangle \tag{16}$$

で定義される。すると、この系のコヒーレント状態 $|\mu(\vec{n})\rangle$ は

$$|\mu(\vec{n})\rangle = \frac{1}{(1+|\mu(\vec{n})|^2)^S} \exp[\mu(\vec{n}) S^+(\vec{n})] |0\rangle_{\vec{n}} \tag{17}$$

で表わされる[8]。$\mu(\vec{n})$ は格子点 $\vec{n}$ に associate した複素数である。次の形の $\mu(\vec{n})$ の完全性

$$\frac{2S+1}{\pi} \int \frac{d\,\mathrm{Re}[\mu(\vec{n})]\; d\,\mathrm{Im}[\mu(\vec{n})]}{(1+|\mu(\vec{n})|^2)^2} |\mu(\vec{n})\rangle\langle\mu(\vec{n})| = 1, \tag{18}$$

$\vec{S}(\vec{n})$ のコヒーレント状態表示

$$\langle\mu(\vec{n})|S^+(\vec{n})|\mu(\vec{n})\rangle = 2S\frac{\mu(\vec{n})^*}{1+|\mu(\vec{n})|^2}, \quad \langle\mu(\vec{n})|S^-(\vec{n})|\mu(\vec{n})\rangle = 2S\frac{\mu(\vec{n})}{1+|\mu(\vec{n})|^2}$$

$$\langle\mu(\vec{n})|S^z(\vec{n})|\mu(\vec{n})\rangle = -S\frac{1-|\mu(\vec{n})|^2}{1+|\mu(\vec{n})|^2} \tag{19}$$

を用いると time-evolution 演算子のコヒーレント状態表示

$$\left\langle \prod_{\vec{n}} \mu(\vec{n}) \right| \exp\left[-i\frac{H}{\hbar}(t_f - t_i)\right] \left| \prod_{\vec{n}} \mu(\vec{n}) \right\rangle = \int \mathcal{D}(\{\mu\}) \exp\left(\frac{S}{\hbar}\right) \tag{20}$$

$$S = \int_{t_i}^{t_f} L\, dt \qquad (t_i : \text{initial time}\ ;\ t_f : \text{final time}) \tag{21}$$

の汎関数積分表示が得られる。ここに、L はこの系のラグランジアンで

$$L = \sum_{\vec{n}} \frac{S}{1+|\mu(\vec{n})|^2}\left[\mu(\vec{n})^* i\hbar\frac{d\mu(\vec{n})}{dt} - \mu(\vec{n}) i\hbar \frac{d\mu(\vec{n})^*}{dt}\right] - \left\langle \prod_{\vec{n}} \mu(\vec{n}) \right| H \left| \prod_{\vec{n}} \mu(\vec{n}) \right\rangle \tag{22}$$

の形を持つ。(22)の右辺第二項は系のハミルトニアンのコヒーレント状態表示である。

以上は形式的に厳密な式である。(20)の右辺に於て停留値近似 $\delta S = 0$ を用いると(半古典近似) 次の Lagrange 方程式

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{\mu}(\vec{m})}\right) - \frac{\partial L}{\partial \mu(\vec{m})} = 0 \qquad (23)$$

より

$$i\hbar \frac{d\mu(\vec{m})}{dt} = \frac{(1+|\mu(\vec{m})|^2)^2}{2S} \cdot \frac{\partial \langle \prod_{\vec{m}} \mu(\vec{m}) | H | \prod_{\vec{m}} \mu(\vec{m}) \rangle}{\partial \mu(\vec{m})^*} \qquad (24)$$

が得られる。Hamiltonian が(15)で与えられるとき,(24)式の具体形は

$$i\hbar \frac{d\mu(\vec{m})}{dt} = \epsilon \mu(\vec{m}) - S \sum_{\vec{m}} J(\vec{n},\vec{m}) \frac{\mu(\vec{m})}{1+|\mu(\vec{m})|^2} \qquad (25)$$

となる。(25)は(1)より高次の非線形項を含むが、それが定常局在モードを与えることは(1)式の場合と同様である。

この場合, $\mu(\vec{n}) = \phi(\vec{n}) e^{-i\omega t}$ とおくと, (2)と類似の式

$$\epsilon \phi(\vec{n}) - S \sum_{\vec{m}} J(\vec{n},\vec{m}) \phi(\vec{m}) - S \sum_{\vec{m}} \frac{J(\vec{n},\vec{m}) \phi(\vec{m})^3}{1+\phi(\vec{m})^2} = \omega \phi(\vec{n}) \qquad (26)$$

が得られる。格子グリーン関数 ($E = \hbar\omega$, $\vec{\Delta} = R(\vec{m}) - R(\vec{n})$)

$$g(\vec{n}) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} \frac{e^{i\vec{q}\cdot R(\vec{n})}}{E_0(\vec{q}) - E} \equiv \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} \frac{e^{i\vec{q}\cdot R(\vec{n})}}{\epsilon - S \sum_{\vec{\Delta}} e^{i\vec{q}\cdot\vec{\Delta}} J(\vec{\Delta})} \qquad (27)$$

を用いると,(26)は次の形を取る。

$$\phi(\vec{m}) = S\sum_{\vec{m}'} J(\vec{m},\vec{m}')\, g(\vec{m}-\vec{m}')\frac{\phi(\vec{m}')^3}{1+\phi(\vec{m}')^3} \qquad (28)$$

(1)式の場合と同様,エネルギーバンド $E_0(\vec{k}) = \epsilon - S\sum_{\delta} J(\delta) e^{i(\vec{k}\cdot\vec{\delta})}$ の下端より分離して生ずる局在モードの存在を示すことができる。尚,量子系におけるこのような局在モードは半古典近似 $\delta S=0$ の下で得られたものであることを付記したい。

§4. おわりに

以上,空間不連続系における固有な非線形モードとして,局在モードが存在することを簡単に述べて来た。ここでは,空間不連続系と連続系の場合の非線形モードの本質的相違にまずふれ,その相違は空間の次元数に対してどのように異る様相を持つかと云う点を述べた。また量子系においてはこのような非線形固有モードはどのようになるかと云う点にもふれて来た。もっと議論したい点は数多くあるが,ここで筆をおくことにする。

本論は空間不連続・非線形系の物理学,数理物理学を取扱ったものであるが,近年の数学,数理物理学,物理学は多くの場合,その対極として連続・線形系の場合を取扱って来たような気がする。

この研究会に参加する機会を与えて頂いた同志社大学工学部電気系榎原建司氏に謝意を表したく存じます。

文　献

1) 広田良吾：ソリトンの数理（岩波, 1992）

2) Reference for physicists; Y. Ohta, J. Satsuma, D. Takahashi and T. Tokihiro: Prog. Theor. Phys. Suppl. No. 94 (1988) 210.

3) A. J. Sievers and S. Takeno: Phys. Rev. Lett. 61 (1988) 970.

4) S. Takeno, K. Kisoda and A. J. Sievers: Prog. Theor. Phys. Suppl. No. 94 (1988) 242.

5) G. H. Derrick: J. Math. Phys. 5 (1964) 1252.

6) V. E. Zakharov: in Solitons, S. E. Trullinger, V. E. Zakharov and V. I. Pokrovsky, eds. (North Holland, 1986) p503.

7) V. E. Zakharov, Collapse and Self-focusing of Langmuir Waves, M. Rosenbluth and R. Z. Sagdeev, Handbook of Plasma Physics (Elsevier, Amsterdam, 1984) p81.

8) S. Takeno and K. Kawasaki: J. Phys. Soc. Jpn. 61 (1992) 4547.